

**光と電子系の露わな相互作用の解析：
近接場の衣を纏った電子状態の励起ダイナミクス計算**

分子科学研究所
○竹内嵩， 信定克幸

**Investigation for mutual effect between light and electron system:
Excitation dynamics of electronic states dressed up in an optical near field**

○Takashi Takeuchi, Katsuyuki Nobusada
*Department of Theoretical and Computational Molecular Science,
Institute for Molecular Science, Japan*

【Abstract】 A finite quantum system exposed to an intense laser field reforms itself as new quantum states referred to as dressed states in which matter and light are strongly coupled, generating additional energy levels. Previous theoretical studies dealing with the dressed states have taken into account the interaction between quantum systems and incident external laser fields. Recent studies, however, reveals that a quantum system strongly interacting with a light induces an optical near field which is an enhanced electromagnetic field created by the polarization in the system and locally modifies the incident external field. In this paper, the dressed states exposed to both an incident external field and an optical near field have been investigated by the semi-classical approach based on the Maxwell-Schrödinger equations. We have observed that the optical near field significantly influences the dressed states, generating new energy levels that differ from ones obtained by the conventional theory without optical near fields.

【序】 高強度レーザ場に照射された量子系は、光の衣を纏った新たな状態「ドレスト状態」を形成する[1]。ドレスト状態を扱った従来の理論研究では、外場として入射レーザ場のみを考慮し、ドレスト状態は光照射前の元の状態からレーザ場光子を整数個吸収・放出したエネルギー準位を持つ。

一方、量子系がレーザ場に照射される状況では、量子系近傍に局在する電磁場「近接場」が再帰的に発生することが知られている[2]。近接場は量子系の局所的分極に起因し、入射レーザ場を修正する。そのため、近接場の考慮の有無により、量子系の振る舞いが大きく異なる事を、我々は最適制御パルス設計の問題にて実証した[3]。

本報告では光と電子系の露わな相互作用の計算から近接場を評価し、近接場の影響を受けたドレスト状態の解析を行った。結果、我々が計算したドレスト状態は従来の理論とは異なるエネルギー準位を取り、その差異は近接場の影響の大小により変動することを明らかにした。

【方法】 z 軸方向に自由度を持つ擬 1 次元系の単一電子を解析対象とする。この単一電子は、レーザ場中において、以下の Schrödinger 方程式により記述される。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - q\mathbf{A} \right)^2 \psi + q\phi\psi + V\psi \quad (1)$$

ここで、ベクトルポテンシャル \mathbf{A} 及びスカラーポテンシャル ϕ は Lorentz ゲージに従うとする。

レーザ場が単一電子を励起することにより、局所的な分極が生じる。この分極は分極電流密度 \mathbf{J} により、以下の式(2)として与えられる。

$$\mathbf{J} = q \left\{ \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial z} \right) - \frac{q}{m} |\psi|^2 \mathbf{A} \right\} \hat{\mathbf{a}}_z \quad (2)$$

本報告では光と電子系の露わな相互作用として、この分極電流密度 \mathbf{J} を Maxwell 方程式に逐次代入する半古典論的手法により計算を行う [3, 4]。これを行うことで、量子系近傍にて近接場が励起し、その影響を受けたドレスト状態の評価が可能となる。

【結果・考察】 外場として正弦波状の高強度レーザー場を量子系に照射した。Fig. 1 は電子波束 $|\psi|^2$ の時空間応答分布であり、(a) は Maxwell 方程式・Schrödinger 方程式双方を用いて近接場を計算した結果を示し、(b) は Schrödinger 方程式のみを用いて近接場を無視した結果を参考のため示している。また、図中の横軸・縦軸は、時間軸と量子系の自由度方向を表している。この図より、近接場の考慮の有無により、電子波束の振幅・周期に大きな違いが生じていることが分かる。

Fig. 1 の結果は、高強度レーザー場により励起されたドレスト状態の重ね合わせとなっている。近接場の影響を受けたドレスト状態についてより詳しく調べるため、以下の式(3)を用いて単一電子波動関数のスペクトルを求めた。

$$\Psi(\omega) = \int F[\psi(t, z)] dv \quad (3)$$

Ψ は重ね合わせした各ドレスト状態の時間因子情報を含むため、スペクトルのピーク位置がドレスト状態のエネルギー準位に対応する。

Fig. 2 は、 Ψ の計算結果を示す。青の実線は Fig. 1 (a) に対応する半古典的手法により計算した

波動関数のスペクトル、赤の実線は Fig. 1 (b) に対応する近接場を無視して計算した波動関数のスペクトルである。近接場を無視する場合、Floquet の定理により、ドレスト状態エネルギー準位の解析解を得る事が可能である。図中の緑の破線は、基底状態から第二励起状態を起源としたドレスト状態の解析解である。この図より、近接場を無視したスペクトルである赤の実線のピーク位置は、全て解析解と一致している様子が分かる。一方で、半古典的手法にて計算したスペクトルは、解析解と一致するものもあるが、全体的に高エネルギー側にピーク位置がシフトしている。これにより、近接場の影響を受けたドレスト状態が、従来の近接場を無視したドレスト状態とは異なるエネルギー準位を取っていることが分かる。発表当日は、このエネルギー準位の差異が近接場の影響により変動することを示し、これによる間接的な光物性制御の可能性を報告する。

【謝辞】 本研究は、JST、CREST(No.JPMJCR16N5) の支援を受けたものである。

【参考文献】

- [1] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, *J. Opt. Soc. Am. B* **2**, 1707 (1985).
- [2] A. Lewis and K. Lieberman, *Nature* **354**, 214 (1991).
- [3] T. Takeuchi, S. Ohnuki, and T. Sako, *Phys. Rev. A* **91**, 033401 (2015).
- [4] R. W. Ziolkowski, J. M. Arnold, and D. M. Gogny, *Phys. Rev. A* **52**, 3082 (1995)

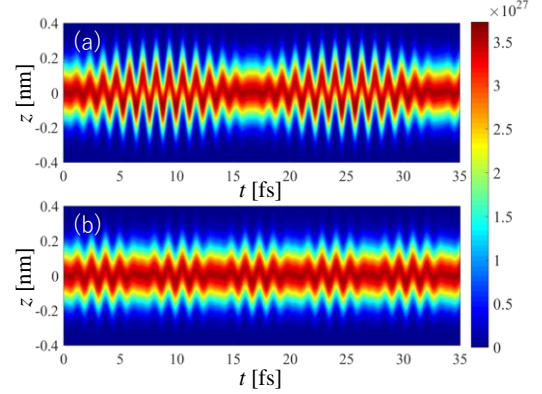


Fig. 1. Spatiotemporal propagation for the electron wave packet $|\psi|^2$ (a) with and (b) without an optical near field.

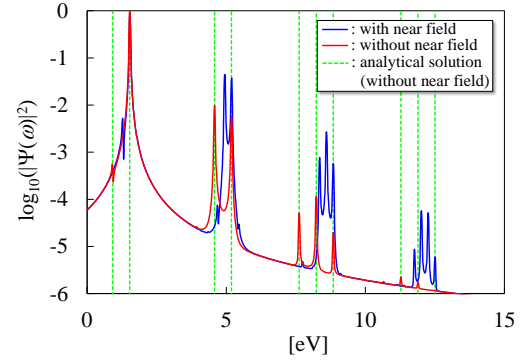


Fig. 2. Energy levels of dressed states.